ecom.tech

Эволюция Transformer: как меняется самая успешная архитектура в DL

Мурат Апишев, ecom.tech





► LLM — основа современного NLP и AI

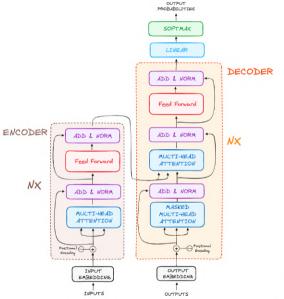


- Доминирующая архитектура — Transformer
- Много архитектурных модификаций и внедрений с 2017



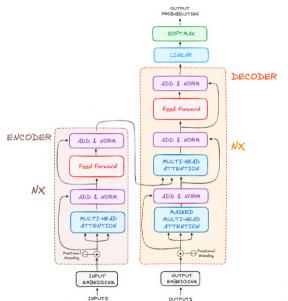
Цель доклада:
 рассмотреть наиболее
 значимые и интересные из идей







- ▶ Позиционное кодирование
- Нормализация
- ► Self-Attention
- Полносвязные слои

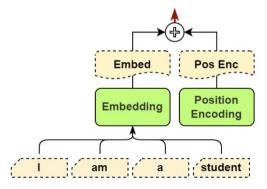


Позиционное кодирование



Позиционное кодирование: абсолютный подход

- ▶ Без информации о позициях токенов любой Transformer работает плохо
- ▶ Абсолютное кодирование
 - один вектор на одну позицию
 - вектор добавляется в вектору эмбеддинга на входе сети





Позиционное кодирование: абсолютный подход

- ▶ Без информации о позициях токенов любой Transformer работает плохо
- ▶ Абсолютное кодирование источник:
 - обучаемые векторы
 - синусоидальные векторы

Позиционное кодирование: абсолютный подход

- ▶ Без информации о позициях токенов любой Transformer работает плохо
- ▶ Абсолютное кодирование просто, но есть проблемы:
 - ightharpoonup низкое качество кодирования \Rightarrow хуже результаты
 - ▶ низкое качество экстраполяции ⇒ нет обобщения на больший контекст

Позиционное кодирование: относительный подход

- ▶ Кодируется не позиция токена, а расстояние между парой
- ▶ Вместо эмбеддинга на входе модификация self-attention

Позиционное кодирование: относительный подход

- ▶ Кодируется не позиция токена, а расстояние между парой
- ▶ Вместо эмбеддинга на входе модификация self-attention
- Вектор расстояния прибавляется
 - при подсчёте логита веса внимания к вектору ключа
 - при подсчёте выхода внимания к вектору значения
- ▶ Векторы общие для голов и обучаются на каждое возможное расстояние

Позиционное кодирование: относительный подход

- ▶ Кодируется не позиция токена, а расстояние между парой
- ▶ Вместо эмбеддинга на входе модификация self-attention
- Можно переписать формулу подсчёта внимания, репараметризовать и убрать зависимость от абсолютной позиции
- Разные части формулы и репараметризации дают кодирования Transformer-XL и DeBERTA



Позиционное кодирование: сдвиги

▶ Ещё проще и эффективнее: прибавить скаляр к логиту веса внимания

Позиционное кодирование: сдвиги

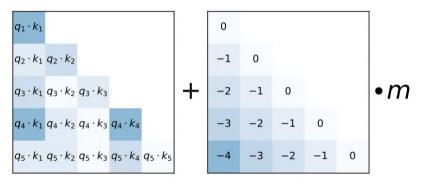
- Ещё проще и эффективнее: прибавить скаляр к логиту веса внимания
- ▶ В Т5 сдвиги 32 скаляра, распределённых по 128 расстояниям i-j



Скаляры свои у каждой головы внимания, но общие для всех слоёв

Позиционное кодирование: сдвиги

- ▶ Ещё проще и эффективнее: прибавить скаляр к логиту веса внимания
- ightharpoonup В AliBi скаляры для i-j не обучаются, а считаются как m(i-j)
- ▶ m заданное число, своё для каждой головы и общее для слоёв:



Позиционное кодирование: вращения

- ▶ RoPE самый популярный метод позиционного кодирования
- ▶ Почти все современные LLM обучаются с ним или его модификациями

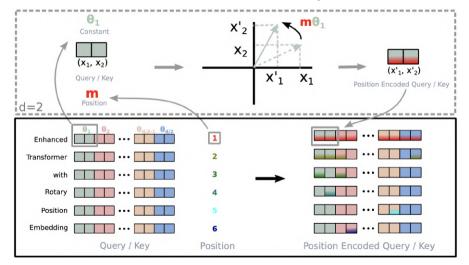


Позиционное кодирование: вращения

- ▶ RoPE самый популярный метод позиционного кодирования
- ▶ Применение RoPE = поворот вектора запроса/ключа на некоторый угол
- Значение угла зависит от индекса его позиции
- ▶ Поворот обоих векторов на один угол не изменит вес внимания
- > Это просто смещение позиций без изменения расстояния

Позиционное кодирование: вращения

▶ Применение RoPE = поворот вектора запроса/ключа на некоторый угол

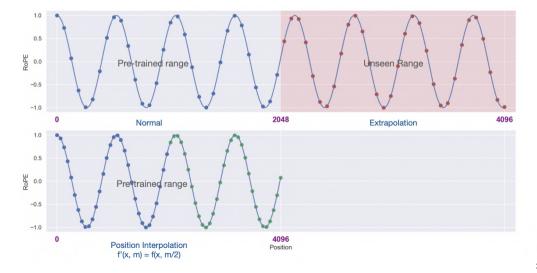


Позиционное кодирование: вращения с интерполяциями

- RoPE тоже слабо адаптируется к росту длины контекста
- ▶ Идея:
 - ▶ обучить модель с RoPE
 - ▶ вложить увеличенный контекст в тот же диапазон
 - ▶ опционально сделать небольшое дообучение
- Одновременно предложено в PI RoPE и SuperHOT RoPE

Позиционное кодирование: вращения с интерполяциями

Идея: вложить увеличенный контекст в тот же диапазон



Позиционное кодирование: вращения с интерполяциями

- ▶ Есть разные подходы к расширению диапазона расстояний
 - ▶ точная настройка сжатия для каждой пары признаков в RoPE
 - ▶ сохранение качества на исходном диапазоне
 - повышение качества на расширенном диапазоне
 - ▶ работа в zero-shot

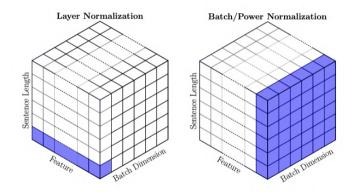


Нормализация



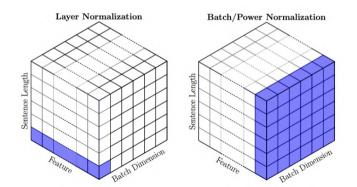
Нормализация: LayerNorm

- Нормализация повышает скорость и стабильность обучения
- ▶ В моделях CV распространена более старая Batch-нормализация



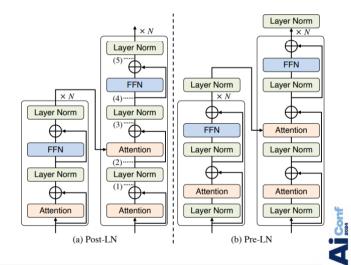
Нормализация: LayerNorm

- ▶ B RNN и Transformer использовать Batch-нормализацию неудобно:
 - нужны большие батчи для сбора статистики
 - lacktriangle в NLP у последовательностей разная длина ightarrow флуктуации статистик
- ▶ Альтернатива Layer-нормализация вектора каждого токена



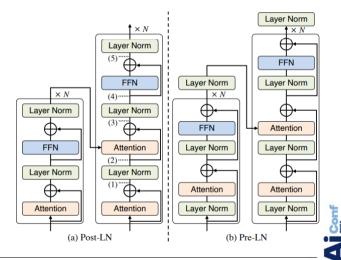
Нормализация: порядок встраивания

- В исходном Transformer нормализация после MHSA и FFN (Post-LN)
- ► Ниже стабильность и выше влияние LR и warmup



Нормализация: порядок встраивания

- В современных моделях доминирует Pre-LN
- ► Вариации типа Sub-LN в Magneto непопулярны



Нормализация: RMSNorm

- ► LayerNorm центрирование и нормирование на отклонение активаций *а*
- ▶ Изначально считалось, что обе операции существенно важны

Нормализация: RMSNorm

- ► LayerNorm центрирование и нормирование на отклонение активаций а
- ▶ Изначально считалось, что обе операции существенно важны
- ► RMSNorm LayerNorm без центрирования:

$$\hat{a}_i = \frac{a_i - \chi}{\sigma}, \quad \mu = 1, \quad \alpha_i, \quad \sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (a_i - \chi)^2} = \text{RMS}(a)$$



Нормализация: RMSNorm

- ► LayerNorm центрирование и нормирование на отклонение активаций *а*
- ▶ Изначально считалось, что обе операции существенно важны
- ► RMSNorm LayerNorm без центрирования:

$$\hat{a}_i = \frac{a_i - \chi}{\sigma}, \quad \mu = \sum_{i=1}^n a_i, \quad \sigma = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (a_i - \chi)^2} = \text{RMS}(a)$$

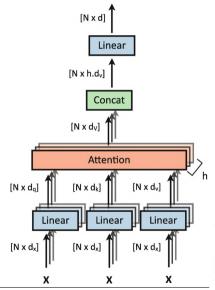
- ▶ Качество то же, но быстрее
- RMSNorm стандарт для современных LLM (LLaMA, Qwen, Mistral)

Model	Time
Baseline	315±6.30s
BatchNorm-Everywhere	$348 \pm 10.5 s$
BatchNorm-LSTM	$345\pm11.2s$
LayerNorm	392±5.70s
RMSNorm	333±5.20s (15.1%)
pRMSNorm	330±5.50s (15.8%)

Механизм внимания

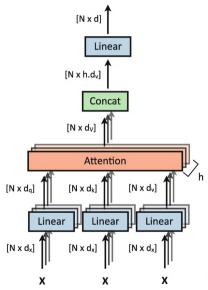


Механизм внимания: базовый MHSA



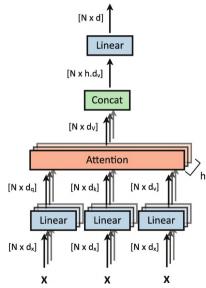
Механизм внимания: базовый MHSA

- Основные проблемы:
 - ightharpoonup сложность подсчёта SA $O(n^2)$
 - ightharpoonup потребление памяти при кэшировании векторов K и V
- Прямое увеличение длины контекста неэффективно



Механизм внимания: базовый MHSA

- ▶ Идеи модификаций MHSA:
 - разреженное и локальное внимание
 - рекуррентная обработка
 - понижение размерностей векторов
 - использование KNN-индексов
 - иерархическая обработка
 - ightharpoonup уменьшение числа наборов K и V



Механизм внимания: разреженность и локальность

- Матрица весов внимания существенно разреженная
- ► Если вычислять только нужные подмножества, можно существенно уменьшить вычисления с небольшим ухудшением качества

Механизм внимания: разреженность и локальность

- ▶ Основные варианты подсчёта весов внимания для токена:
 - с непосредственными соседями (внутри групп или SWA)
 - c соседями с заданным Dilation Rate разреживанием (которое можно усиливать на верхних слоях)
 - со случайными токенами последовательности
 - с глобальными токенами (они со всеми, все с ними)



(a) Full n^2 attention



(b) Sliding window attention



(c) Dilated sliding window



(d) Global+sliding window



Механизм внимания: разреженность и локальность

- Основные варианты подсчёта весов внимания для токена:
 - с непосредственными соседями (внутри групп или SWA)
 - с соседями с заданным Dilation Rate разреживанием (которое можно усиливать на верхних слоях)
 - со случайными токенами последовательности
 - с глобальными токенами (они со всеми, все с ними)
- Работы: Sparse Transformer, Longformer, Big Bird, LongT5, LongNet
- ▶ Те же идеи используют GPT-3, Qwen, Mistral, Qwen 2

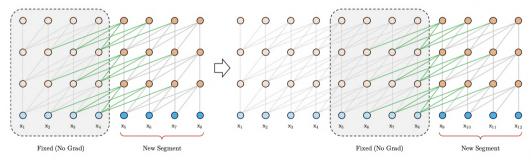
Qwen2 Technical Report, 2024

Механизм внимания: рекурентность по сегментам

 Идея: разделить длинную последовательность на сегменты, обрабатывать один за другим и передавать вперёд информацию

Механизм внимания: рекурентность по сегментам

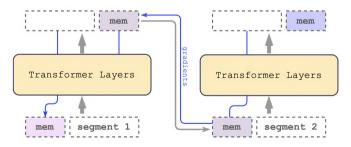
- ► Transformer-XL:
 - ightharpoonup выходы SA сегмента i идут в кэш и используются для (i+1)-го
 - ightharpoonup выходы двух сегментов конкатенируются, по ним считаются K и V
 - ightharpoonup Q только по токенам текущего сегмента, градиенты тоже только по ним



Механизм внимания: рекурентность по сегментам

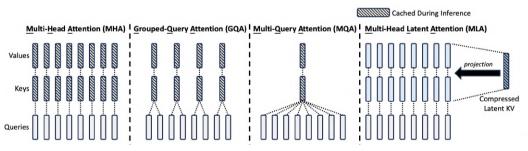
► RMT:

- ▶ в начало каждого сегмента добавляются М токенов «векторов памяти»
- lacktriangle кодировщик выходные векторы i-го сегмента для этих токенов идут первыми на вход для i+1-го сегмента
- lacktriangle декодировщик векторы памяти есть ещё и в конце, первые несут информацию из i-1-го сегмента, а векторы последних понесут в i+1-й

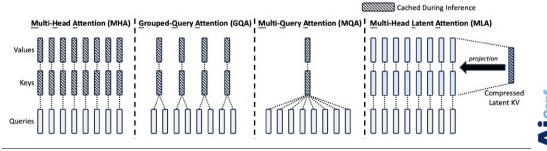


 $lackbox{Q}$ должны быть свои для каждой головы внимания, K и V – нет, их можно разделять между головами для экономии вычислений и памяти

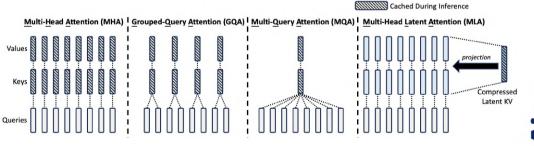
ightharpoonup MQA – один набор K и V на все головы



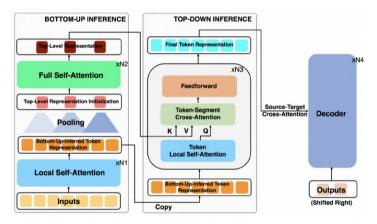
- ightharpoonup MQA один набор K и V на все головы
- ightharpoonup GQA один набор K и V на каждую группу голов



- ightharpoonup MQA один набор K и V на все головы
- ightharpoonup GQA один набор K и V на каждую группу голов
- ► MLA
 - на токен вычисляется и кэшируется один вектор большей размерности
 - ightharpoonup он проектируется общей весовой матрицей в набор K/V для всех голов



▶ Top Down Transformer: локальное внимание + полный Cross-SA



▶ SLED: локальное внимание с контекстом, Cross-SA в декодировщике

- Кодировщик:
 - ▶ параллельный self-attention для всего входа
 - полный пересчёт для генерации токена

- Кодировщик:
 - ▶ параллельный self-attention для всего входа
 - полный пересчёт для генерации токена
- Декодировщик:
 - > эффективный self-attention для генерации токена
 - большие кэши и долгая обработка префикса

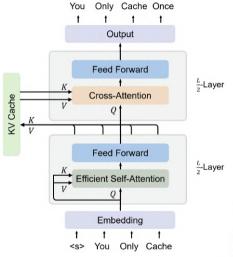
- Кодировщик:
 - ▶ параллельный self-attention для всего входа
 - полный пересчёт для генерации токена
- Декодировщик:
 - > эффективный self-attention для генерации токена
 - большие кэши и долгая обработка префикса
- ▶ Полный Transformer:
 - быстрая обрабатка префикса
 - эффективный self-attention для генерации токена
 - большие кэши и долгая обработка префикса
 - кодировщик не используется при генерации



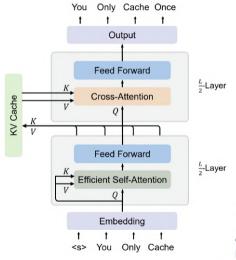
- ▶ Идея: архитектура типа «кодировщик-декодировщик», но с
 - ▶ авторегрессионной обработкой префикса
 - использованием кодировщика и для генерируемых токенов
 - уменьшением размеров кэшей в декодировщике



- YOCO: декодировщик разбивается пополам по слоям
- Нижний обычный декодировщик, но с SWA работает быстро и с кэшем O(1)

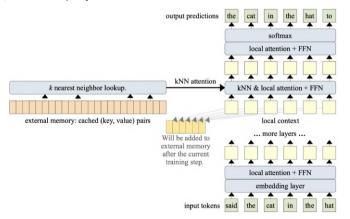


- ► YOCO: декодировщик разбивается пополам по слоям
- Верхний полный MHSA, но с Cross-SA, с общими на всех слоях К и V из кэша
- ▶ Префикс обрабатывается только нижним блоком — ускорение



Механизм внимания: сегменты и kNN-индексы

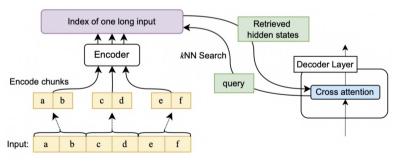
- ▶ Memorizing Transformer: в последнем блоке kNN-Augmented Attention
 - ightharpoonup блок памяти для K и V размера M, добавление в конец
 - ightharpoonup складываются результаты обычного MHSA и с K и V из kNN





Механизм внимания: сегменты и kNN-индексы

- ightharpoonup Unlimiformer: полный Transformer, локальное внимание в кодировщике, выходы h_e кэшируются
- ▶ kNN-Augmented Attention с Cross-SA в слоях декодировщика
- ightharpoonup Хранение h_e (общих для всех слоёв) вместо K и V экономит память
- ightharpoonup K и V легко получаются изменением порядка подсчёта QK^T



Механизм внимания: RetNet

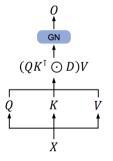
▶ RetNet похож на Transformer, вместо MHSA – MH Retention

Механизм внимания: RetNet

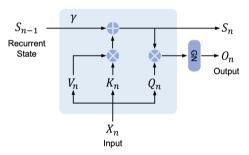
- ▶ RetNet похож на Transformer, вместо MHSA MH Retention
- ▶ Retention механизм преобразования последовательности
- При ограничениях на вид параметров может вычисляться
 - ▶ рекурентно (как RNN)
 - ▶ параллельно (как MHSA)

Механизм внимания: RetNet

- ► Retention механизм преобразования последовательности
- При ограничениях на вид параметров может вычисляться
 - ▶ рекурентно (как RNN)
 - ▶ параллельно (как MHSA)

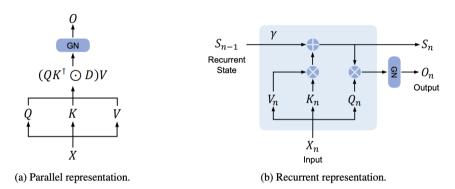


(a) Parallel representation.



(b) Recurrent representation.

Механизм внимания: RetNet.



- Гибридное представление для обучения на длинном входе:
 - вход разбивается на части, каждая обрабатывается параллельно
 - между частями обработка рекуррентная (родственно Cross-SA)



Механизм внимания: State Space Models

- ▶ Transformer ≈ Self-Attention, вместо оптимизации можно заменить
- ► Transformer: качественно, но неэффективно (запоминается весь вход)
- ► RNN: некачественно, но эффективно (запоминается вектор состояния)
- ► SSM: качественно и эффективно

Механизм внимания: State Space Models

- ▶ Transformer ≈ Self-Attention, вместо оптимизации можно заменить
- ► Transformer: качественно, но неэффективно (запоминается весь вход)
- ▶ RNN: некачественно, но эффективно (запоминается вектор состояния)
- ▶ SSM: качественно и эффективно
- ▶ Модели, родственные Linear RNN и Linear Attention
- Разные представления позволяют эффективное обучение и инференс
- В обзоре Матра-360 таксономия из более 20 моделей в 4 группах

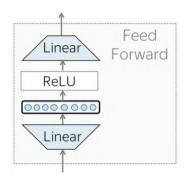


Полносвязные слои



Полносвязные слои: базовый FFN

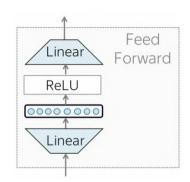
- ightharpoonup Базовый вариант (без bias): $\max(xW_1,0)W_2$
- ► FFN до 2/3 от общего числа параметров сети





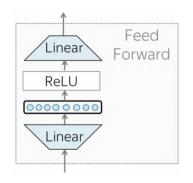
Полносвязные слои: базовый FFN

- ightharpoonup Базовый вариант (без bias): $\max(xW_1,0)W_2$
- ▶ FFN до 2/3 от общего числа параметров сети
- ► Self-attention взаимная важность токенов
- FFN обрабатывает эту информацию и содержит основные «знания» модели, включая фактологию



Полносвязные слои: базовый FEN

- \triangleright Базовый вариант (без bias): $\max(xW_1,0)W_2$
- ▶ FFN до 2/3 от общего числа параметров сети
- ▶ Self-attention взаимная важность токенов
- ▶ FFN обрабатывает эту информацию и содержит основные «знания» модели, включая фактологию



- ► FFN можно рассматривать как KV-хранилище, первый слой содержит ключи, второй - значения
- Пробуют редактировать факты изменением весов FFN обученной модели



Полносвязные слои: функции активации

► FFN с ReLU — не единственный возможный вариант блока с полносвязными слоями

Полносвязные слои: функции активации

- ► FFN с ReLU не единственный возможный вариант блока с полносвязными слоями
- Пробуют различные активации:
 - lacktriangle GeLU = $x\Phi(x)$, $\Phi(x)$ функция распределения $\mathcal{N}(0,1)$
 - ightharpoonup Swish $=x\sigma(eta x)$, $\sigma(x)$ сигмоида, eta гиперпараметр (при eta=1 SiLU)

Полносвязные слои: функции активации

- ► FFN с ReLU не единственный возможный вариант блока с полносвязными слоями
- Пробуют различные активации:
 - lacktriangle $\operatorname{GeLU} = x \Phi(x)$, $\Phi(x)$ функция распределения $\mathcal{N}(0,1)$
 - ightharpoonup Swish $=x\sigma(eta x)$, $\sigma(x)$ сигмоида, eta гиперпараметр (при eta=1 SiLU)
- ▶ Все функции гладкие модификации ReLU
 - нет проблемы большого числа нулевых бесполезных нейронов
 - нет резкого перехода в нуле
- Нет однозначного мнения о том, какая из них лучше
- ▶ GeLU используется в FFN блоках BERT и GPT-2

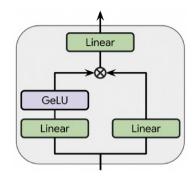


Полносвязные слои: GLU

► Gated Linear Units:

$$\mathrm{GLU}(x) = \sigma(xW_1) \otimes xW_2$$
,

- ⊗ покомпонентное умножение
- ▶ В GLU тоже можно заменять активации, популярные варианты GeGLU (GeLU) и SwiGLU (Swish / SiLU)



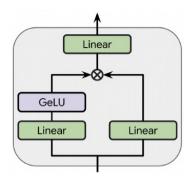


Полносвязные слои: GLU

► Gated Linear Units:

$$\mathrm{GLU}(x) = \sigma(xW_1) \otimes xW_2$$
,

- \otimes покомпонентное умножение
- ▶ В GLU тоже можно заменять активации, популярные варианты GeGLU (GeLU) и SwiGLU (Swish / SiLU)



- ▶ В FFN первый слой и активации заменяются на GLU
- ▶ Три матрицы весов, для сохранения общего числа параметров внутренняя размерность блока уменьшается на треть
- ▶ Модификация активно используется (LLaMA, Qwen, Mistral, Griffin)

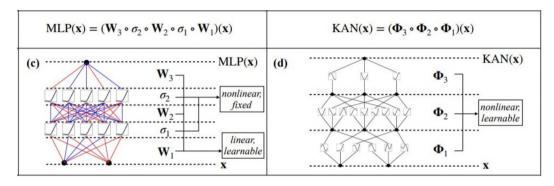


Полносвязные слои: КАП

- Основная задача нейронной сети − приблизить на основе данных некоторую функцию в многомерном пространстве аргументов
- ▶ FFN работают благодаря универсальной теореме аппроксимации
- Альтернативный подход теорема Колмогорова-Арнольда:

Любая непрерывная функция многих переменных может быть представлена в виде суперпозиции непрерывных функций одной переменной с использованием сложения

Полносвязные слои: КАП

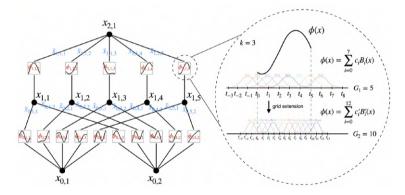


- ► KAN:
 - рёбра сети обучаемые активации
 - узлы сети операция сложения



Полносвязные слои: КАП

- Функция активации взвешенная сумма двух слагаемых:
 - residual connection с активацией
 - линейная комбинация сплайнов



Веса слагаемых и линейной комбинации обучаемые



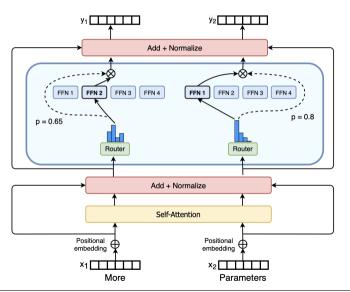
Полносвязные слои: КАМ

- КАП выглядит перспективно и активно развивается
- Модификации сети: полиномы Чебышева, вейвлеты или коэффициенты Фурье вместо сплайнов
- ▶ Повышение производительности: efficient-kan
- ▶ Но экспериментальных доказательств превосходства над FFN в общем случае недостаточно, часть результатов противоречивы

Полносвязные слои: Mixture-of-Experts

- Если учить оптимально, то больше весов ⇒ выше качество
- ▶ Но больше весов ⇒ медленнее инференс
- ▶ Решение Mixture-of-Experts, «экспертами» становятся FFN-слои

Полносвязные слои: Mixture-of-Experts





Полносвязные слои: Mixture-of-Experts

- ▶ Параметров сильно больше, но при обработке каждого токена активируется небольшая часть
- ▶ Эксперт учится решать свои типы задач, имеет свои доменные знания

Полносвязные слои: проблемы МоЕ

▶ Нагрузка распределяется по экспертам неравномерно, сеть вырождается, качество падает

Полносвязные слои: проблемы МоЕ

 Вместо доменной информации эксперты улавливают родственные токены: имена, артикли, спецсимволы, определённые части речи

	1	1
Punctuation	Layer 2 Layer 6	,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,,
Conjunctions and articles	Layer 3 Layer 6	The t
Verbs	Layer 1	died falling identified fell closed left posted lost felt left said read miss place struggling falling signed died falling designed based disagree submitted develop

Полносвязные слои: развитие МоЕ

 Регуляризация loss для Router для балансировки распределения и добавление ограничений на ёмкость эксперта

Полносвязные слои: развитие MoE, Mixtral

- ▶ Популярная открытая сравнительно небольшая модель Mixtral
 - ▶ 8 экспертов блоков FFN со SwiGLU, 2 активных на токен
 - 47В параметров, 13В активных на токен
 - эффективная реализация за счёт разреженного матричного умножения



Полносвязные слои: развитие MoE, Mixtral

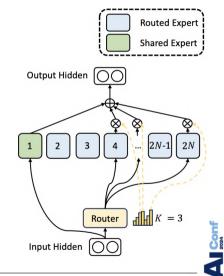
- ▶ Популярная открытая сравнительно небольшая модель Mixtral
 - 8 экспертов блоков FFN со SwiGLU. 2 активных на токен
 - 47В параметров, 13В активных на токен
 - эффективная реализация за счёт разреженного матричного умножения

```
Question: Solve -42*r + 27*c = -1167 and 130*r
Answer: 4
Question: Calculate -841880142.544 + 411127.
Answer: -841469015.544
Question: Let x(g) = 9*g + 1. Let q(c) = 2*c +
Answer: 54*a - 30
```

A model airplane flies slower when flying into th wind and faster with wind at its back. When launch right angles to the wind, a cross wind, its ground compared with flying in still air is (A) the same (B) greater (C) less (D) either grea or less depending on wind speed

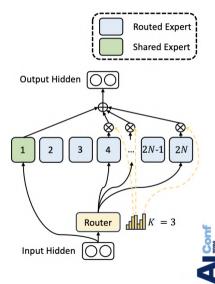
Полносвязные слои: paзвитие MoE, DeepSeekMoE

- Вектор токена разделяется на части
- Каждая часть идёт к своему эксперту
- Больше экспертов, меньше размерность
- ▶ Общие эксперты для всех токенов



Полносвязные слои: paзвитие MoE, DeepSeekMoE

- Тот же объём вычислений и число параметров – выше качество и скорость инференса, чем у обычного МоЕ
- Эксперты более доменные и важные удаление 2-3 ощутимо роняет перплексию
- ► В версии 2 добавляется Multi-Head Latent Attention для уменьшения кэшей



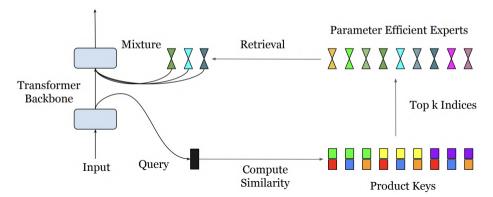
Полносвязные слои: развитие MoE, PEER

- ▶ Много небольших узких экспертов лучше, чем мало больших и общих
- Гипотезы:
 - выше качество
 - лучше интерпретируемость
 - возможность обучения на потоках данных без забывания
- ▶ PEER МоЕ с большим числом экспертов из одного нейрона



Полносвязные слои: развитие MoE, PEER

- ightharpoonup Вектор токена x проектируется в запрос (как в MHSA)
- ▶ У каждого эксперта есть вектор ключа, отбор топ-К экспертов
- ► Ответ $\sigma(u^Tx)v$, u, v параметры эксперта
- ▶ Векторы выбранных экспертов складываются с весами из softmax



Полносвязные слои: развитие MoE, PEER

- ightharpoonup Если K=1, то h голов такого MoE равны по размеру одному эксперту обычного MoE с h нейронами
- ▶ Но вместо фиксированной матрицы разные комбинации строк для разных токенов и запросных весов
- ► Слой может заменять FFN или встраиваться между обученными блоками
- ▶ Направление выглядит перспективно, но тестов ещё недостаточно

ecom.tech

https://shorturl.at/hgaYK

Текущий рецепт LLM:

- Byte-level BPE
- RoPE и его вариации
- pre-LayerNorm, RMSNorm
- SwiGLU
- Sparse Attention, SWA, GQA
- ► MoE





Mypaт Апишев, ecom.tech Технический руководитель поиска для «Мегамаркета» mel-lain@vandex.ru

